

مطالعه قطبش اسپینی و خواص الکترونی پیوندگاه‌های $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$

ناهید قادری^۱، سید جواد هاشمی‌فر^۱، هادی اکبرزاده^۱ و ماریا پرسی^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

۲. گروه فیزیک، دانشگاه تریست، ایتالیا

چکیده

اخیراً آلیاژ هویسلر Co_2MnSi به علت داشتن خاصیت نیم فلزی برای کاربرد در صنعت اسپینترونیک که در آن کمیت اصلی در ترابری، اسپین حامل‌ها می‌باشد، مورد توجه قرار گرفته است. بررسی اثرات سطح مشترک و طراحی سطوح مشترک ایده آل با نیم رسانا که در آنها ماهیت نیم فلزی Co_2MnSi حفظ شود برای اهداف صنعتی بسیار حائز اهمیت است. در اینجا خواص الکترونی و مغناطیسی $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ با محاسبات اولیه کوانتومی در چارچوب نظریه تابعی چگالی اسپینی و با استفاده از روش شبه پتانسیل و با تقریب GGA برای انرژی تبادل-همبستگی ارائه شده است. در این محاسبات تنها پیوندگاه MnMn-As در نظر گرفته شد که در آن با جایگزین کردن Mn به جای Si یک لایه اضافی MnMn در پیوندگاه ایجاد کردیم. در نمودار نوارهای انرژی و منحنی چگالی حالت‌ها تعداد کمی از حالت‌های سطح مشترک درگاف حالت اقلیت اسپینی مشاهده شد که بر روی اتم‌های واقع در پیوندگاه جای‌گزیده می‌باشند. با این وجود قطبش اسپینی بالای ۹۰٪، در سیستم وجود دارد که نسبت به مقدار تجربی، ۱۲٪، به میزان قابل توجهی افزایش یافته است. همچنین ناپیوستگی نواری و نمودار سد شاتکی در محل پیوندگاه برای دوکانال اسپینی اکثریت و اقلیت به دست آمد.

واژه‌های کلیدی: محاسبات ابتدا به ساکن، تکنیک شبه پتانسیل، آلیاژ هویسلر Co_2MnSi ، مرز مشترک نیم فلز/نیم رسانا

Spin polarization and electronic properties of $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ heterojunction

N.Ghaderi¹, S.J.Hashemifar¹, H.Akbarzadeh¹, and M.Peressi²

¹.Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

² Department of Physics, University of Trieste, Trieste, Italy

Abstract: Co_2MnSi Heusler alloy, due to its half metallic properties and its potential applications in spintronic industry has attracted substantial attractions in recent years. Investigation of the interface properties of this alloy with well known semiconductors, such as GaAs, is of special interest. Hence, we studied the electronic and magnetic properties of $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ heterojunction by using spin density functional ab-initio method. The electron core interaction was approximated by pseudo potential method and the exchange correlation energy was calculated within Generalized Gradient Approximation (GGA). We limited our calculation to MnMn-As interface that was constructed by substituting Si with Mn atom. By examining the energy band and density of state curves we found out that a few interface states exist in the minority energy gap. However, the calculated spin polarization is 90%, much higher than the experimental 12% value. Furthermore, the band alignments were extracted for minority and majority spin channels.

Keywords: Co_2MnSi , spintronic, $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$

E-mail of corresponding author (s): : nahid.ghaderi@ts.inf.it

مقدمه

می شود که علاوه بر آنکه سرعت محاسبات را بالا می برد برای مطالعه خواصی که از رفتار الکترون ها در نزدیکی هسته تأثیر نمی پذیرند، مناسب می باشد. شبه پتانسیل های از نوع بسیار نرم در این محاسبات به کار گرفته شده است و توابع موج الکترونی بوسیله مجموعه امواج تخت با انرژی قطع ۳۵ ریدبرگ بسط داده شده اند. منطقه اول بریلون ابرسلولی که سطح مشترک را توصیف می کند با سلول بندی منخورست-پک (۱ ۸ ۸) [۶] تقسیم بندی شد و ترکیب حالت های الکترونی به روش نقاط ویژه [۶،۷] انجام شد. ضمناً انتگرال گیری روی نقاط k در منطقه اول بریلون برای Co_2MnSi و سطح مشترک به روش اسمیرینگ، smearing [۸] و با پهن شدگی ۰/۰۱ انجام شده است.

ساختار سطح مشترک

سطح مشترک $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ ب وسیله یک ساختار تراگونال حاوی ۲۹ اتم که محورهای آن 45° نسبت به محورهای ساختار مکعبی چرخیده اند ساخته شد (شکل ۱) که در آن پارامتر شبکه در صفحه Co_2MnSi مساوی با پارامتر شبکه GaAs انتخاب شد. Co_2MnSi در حالت انبوه د ارای ساختار کریستالی مرکز سطحی با پارامتر شبکه تجربی ۵/۶۷ آنگستروم می باشد [۳] که بسیار نزدیک به پارامتر شبکه GaAs ، ۵/۶۵ آنگستروم، است. پارامتر شبکه محاسباتی Co_2MnSi حدود ۵/۶۴ آنگستروم به دست آمد که نزدیک به مقدار تجربی اما بسیار کوچک تر از پارامتر شبکه تجربی GaAs ، ۵/۷۴ آنگستروم است. این تفاوت بیان گر آن است که در شبیه سازی ما با مساوی گرفتن پارامتر شبکه در صفحه Co_2MnSi با مقدار نظیر در GaAs ، نیم فلز را عملاً تحت تنش بسیار بزرگتر از واقعیت قرار می دهیم. در مقابل از آنجائی که در نظر گرفتن پارامتر شبکه تجربی GaAs موجب اعمال تنش کمتری نزدیک به تجربه می شود، لذا در این محاسبات

Co_2MnSi در زمره آلیاژهای هویسلر قرار دارد که به علت دارا بودن خاصیت نیم فلزی و دمای کوری بالا اخیراً برای کاربرد به عنوان منبع تزریق حامل های اسپین قطبیده در صنعت اسپینترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱،۲]. خاصیت نیم فلزی این ترکیب از وجود گاف انرژی برای تنها یکی از حالت های اسپینی نشأت می گیرد که قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در سطح فرمی آن را موجب می شود. ساختار Co_2MnSi مکعبی مرکز سطحی و نزدیک به ساختار اکثر نیم رساناهای معمول در صنعت الکترونیک است. از این رو بر روی آنها قابل رشد می باشد. اما اثرات سطح مشترک می تواند تأثیر مخرب بر خاصیت نیم فلزی داشته باشند، لذا طراحی سطح مشترک مناسب نیم فلز- نیم رسانا و بررسی خواص الکترونی آن از اهمیت به سزایی برخوردار است. رشد Co_2MnSi بر روی GaAs در جهت [۰۰۱] اخیراً گزارش شده است اما متأسفانه به علت وجود ناکاملی ها در رشد، قطبش اسپینی بالایی مشاهده نشد (تنها ۱۲٪) [۳]. بنابر این بر آن شدیم تا سطح (۰۰۱) مشترک بین Co_2MnSi با GaAs را شبیه سازی نموده و با استفاده از محاسبات مبتنی بر اصول اولیه کوانتومی و بررسی خواص الکترونی، سطح مشترک مناسب برای حفظ خاصیت نیم فلزی را حدس بزنیم. کار حاضر نتایج حاصل از بررسی یکی از پیوندگاه هاست.

رهیافت محاسباتی

محاسبات ما بر پایه نظریه تابعی چگالی [۴] و با تقریب گرادیان تعمیم یافته، GGA ، برای انرژی تبادل-همبستگی و با استفاده از کد $PWscf$ [۵] که از روش شبه پتانسیل استفاده می کند انجام شده است. از آنجائی که پیوندهای شیمیایی و اکثر رفتارهای فیزیکی از الکترون های والانس نشأت می گیرند لذا در این روش پتانسیل الکترون- یون در نزدیکی هسته تقریب زده

آمد. ساختار شبیه سازی شده دارای ۲۲ لایه و ۸ عملگر تقارنی است.

خواص الکترونی و مغناطیسی

بعد از یافتن مکان ایده آل اتم های نزدیک پیوندگاه خواص الکترونی و مغناطیسی این ساختار قابل استخراج است. بررسی نمودار چگالی حالت های ابرسلول مقدار کمی از حالت های سطح مشترک را در گاف حالت اقلیت اسپینی نشان می دهد (شکل ۲).

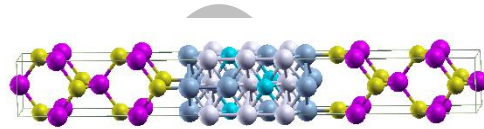
با این وجود قطبش اسپینی در سطح فرمی در حدود ۹۰٪ است که در مقایسه با مقدار تجربی، ۱۲٪، [۳] بهبود یافته است. نمودار نوارهای انرژی نزدیک سطح فرمی نیز در شکل (۳) آورده شده است.

همان گونه که دیده می شود تنها دو حالت به میزان کمی انرژی فرمی را قطع کرده اند که عموماً ناشی از اثرات سطح مشترک بوده و در Mn و As واقع در پیوندگاه جای گزیده می باشند.

به منظور بررسی کیفی اثرات مغناطیسی سطح مشترک، می توان مغناطش اتم های سطح مشترک را از تفاضل چگالی حالت های اتمی دو کانال اسپینی، تعیین کرد. مغناطش اتمی Mn اصلی در پیوندگاه را $4/11 \mu_B$ به دست آوردیم که بزرگ تر از مقدار محاسبه شده در حالت انبوه $3/30 \mu_B$ است. به نظر می رسد بر هم کنش فرومغناطیس Mn ها در پیوندگاه عامل اصلی این افزایش قابل توجه نسبت به حالت انبوه که در آن Mn با Si برهم کنش پاد فرومغناطیس دارد، می باشد.

مغناطش As نیز در پیوندگاه نسبت به حالت انبوه $0/37 \mu_B$ افزایش یافته و به مقدار غیر صفر اما کوچک می رسد که ناشی از اثرات سطح مشترک است. این اتم با Mn جایگزین شده در پیوندگاه به جای Si برهم کنش پاد فرومغناطیس دارد و موجب کاهش مغناطش آن، $3/27 \mu_B$ ، در مقایسه با Mn واقع در جایگاه اصلی می شود. مقدار اندازه گیری شده در آزمایشگاه $2/6 \mu_B$

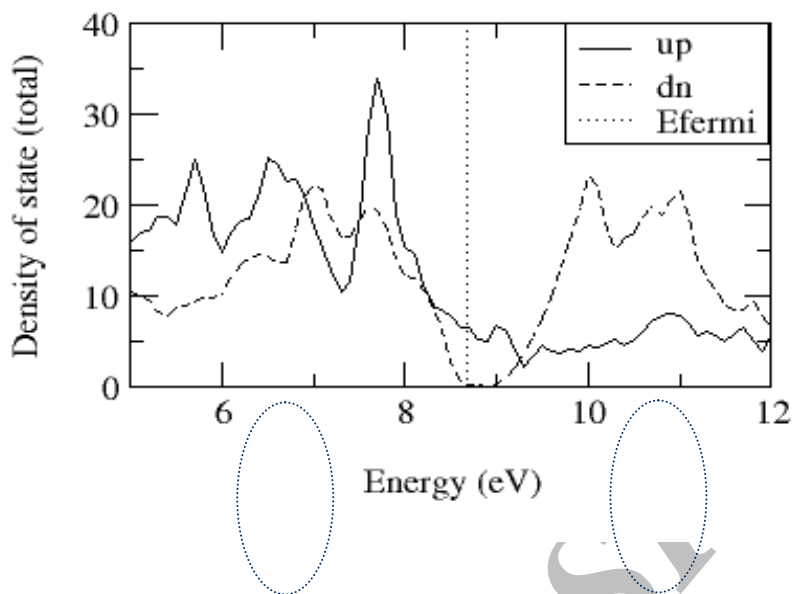
پارامتر شبکه تجربی GaAs در نظر گرفته شد. پایه GaAs ثابت و فاصله بین لایه های آن بدون تغییر باقی می ماند و فاصله بین لایه های Co_2MnSi با بهینه کردن حجم آن در حالت انبوه هنگامی که پارامتر شبکه در صفحه آن مساوی با پارامتر شبکه تجربی GaAs است و با مینیمم کردن انرژی یا صفر کردن تنش در جهت [۰۰۱] به دست آمد.



شکل ۱. ابرسلول به کار گرفته شده در محاسبات. محدوده پیوندگاه با نقطه چین مشخص شده است.

مطالعه سطوح (001) Co_2MnSi ، سطح MnMn را انتخاب مناسبی برای حفظ خاصیت نیم فلزی آن پیش بینی کرده است [۹]. لذا در ابرسلول طراحی شده سطح انتهایی Co_2MnSi را در دو سمت، لایه MnSi گرفتیم که در آن Si با Mn جایگزین شده است و آخرین سطح GaAs با لایه As به Co_2MnSi وصل شد (جذب سطحی Mn روی GaAs نشان داده است که Mn بیشتر تمایل به تشکیل پیوند با As دارد و پیوند Mn-As از Mn-Ga قویتر است [۱۰]). Mn اصلی در صفحه (001) بصورت ضربدری با As [۱۰] و در فاصله $d = 2/11 \text{ \AA}$ در هر دو طرف آن قرار دارد و مکان دیگر آن در صفحه که به جای Si در این لایه جایگزین شده، با As لایه زیرین یکسان است. طول ابرسلول به کار گرفته شده یا پارامتر شبکه عمود آن $c = 33/84 \text{ \AA}$ است و ترتیب قرارگیری لایه ها بصورت زیر می باشد.

$\text{As-Ga-As-(MnMn)-Co-MnSi...MnSi-Co-(MnMn)-As-Ga-As...}$
لازم به ذکر است که فاصله d و به تبع آن پارامتر شبکه عمود c بعد از بهینه سازی ساختاری ابرسلول یعنی کمینه کردن انرژی به همراه صفر کردن نیروها به منظور یافتن مکان ایده آل اتم های نزدیک پیوندگاه، به دست



شکل ۲. نمودار چگالی حالت های کل. گاف حالت اقلیت اسپینی مقدار کمی پر شده است.

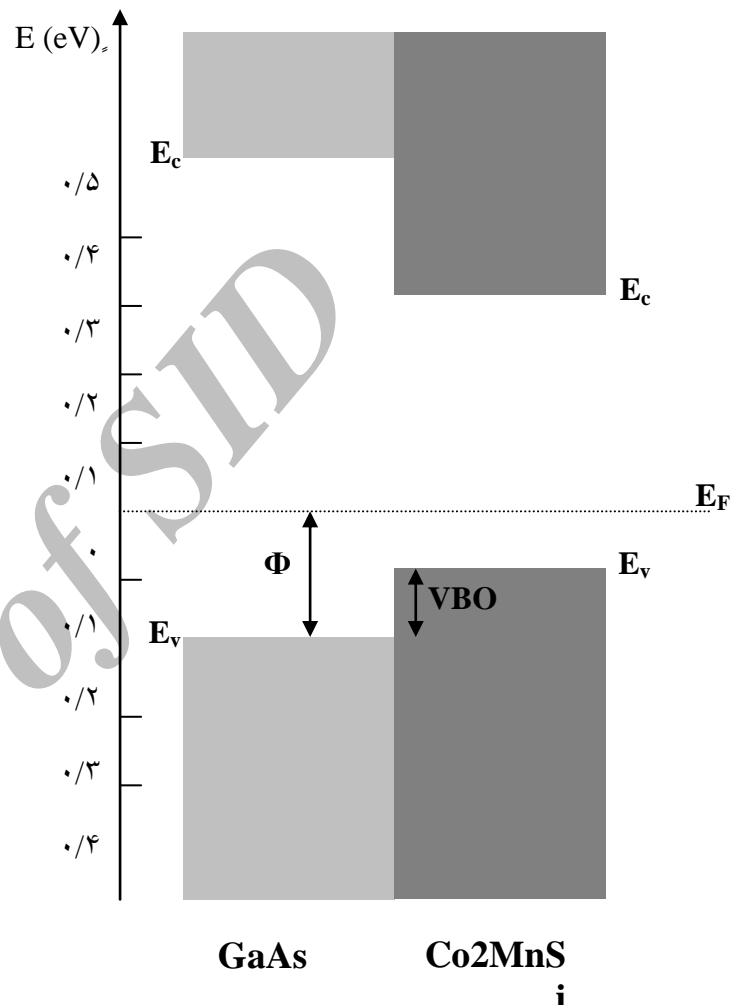
ظرفیت و رسانش نیم رسانای پایه و نیم فلز روشنی کنترل می شود. در حالت اکثریت اسپینی که حالت های الکترونی در سطح فرمی نیم فلز اشغال شده اند محل اتصال مشابه با پیوندگاه فلز - نیم رسانا عمل می کند. نمودار نواری سد شاتکی در این حالت تفاوت بی ن انرژی فرمی در ابرسلول، که توسط نیم فلز تعیین می شود، و انرژی لبه بالایی نوار ظرفیت GaAs است. این سد با Φ در شکل (۴) مشخص شده است. برای حالت اقلیت اسپینی پیوندگاه همانند اتصال ناهمگن نیم رسانا - نیم رسانا عمل می کند و اختلاف انرژی لبه نوار ظرفیت، VBO، که موجب انحنای نواری در پیوندگاه می شود، از اختلاف بین انرژی بالاترین لبه نوار ظرفیت در GaAs و حالت اقلیت اسپینی Co_2MnSi به دست می آید [۱۳]. در عمل لایه های میانی رفتار انبوه گونه دارند و لبه بالایی نوار ظرفیت به وسیله حالت های p عنصر As در GaAs و d عنصر Mn در Co_2MnSi تعیین می شود. لذا ناپیوستگی نواری در پیوندگاه با استفاده از چگالی حالت های اتمی As و Mn لایه های

مغناطش As نیز در پیوندگاه نسبت به حالت انبوه افزایش یافته و به مقدار غیر صفر اما کوچک $0.37 \mu_B$ می رسد که ناشی از اثرات سطح مشترک است. این اتم Mn جایگزین شده در پیوندگاه به جای Si برهم کنش پاد فرومغناطیس دارد و موجب کاهش مغناطش آن، $3.27 \mu_B$ ، در مقایسه با Mn واقع در جایگاه اصلی می شود. مقدار اندازه گیری شده در آزمایشگاه $2.6 \mu_B$ [۳]، بسیار کوچک تر از هر دو مقدار به دست آمده در پیوندگاه و حالت انبوه است که بنا بر محاسبات Sasioglu و همکارانش این اختلاف زیاد بین نتایج نظری و تجربی به علت حضور برخی بی نظمی های بلوری نظیر بدجانیشینی اتم های Mn به جای Co است [۱۱]. اثرات سطح مشترک بعد از چند لایه به شدت تضعیف می شود به طوری که مغناطش اتمی Mn در لایه های میانی $3.33 \mu_B$ ، بسیار نزدیک به حالت انبوه $3.30 \mu_B$ به دست آمد که اندکی کوچک تر از مقدار محاسبه شده توسط Picozzi [۱۲]، $2.92 \mu_B$ ، است. خواص ترابری در این ساختار با نمودار نوار الکترونی در محل پیوندگاه، خصوصاً بوسیله ناپیوستگی نوارهای

مراجع

1. R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. Van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* 50 , 1983 , 2024
2. P. J. Brown, K. U. Neumann, P. J. Webster, and K. R. A. Ziebeck, *J. Phys. Condens. Matter* 12 , 2000 , 1827
3. W. H. Wang, M. Przbylski, W. Kuch, L. I. Cheralaru, J. Wang, Y. F. Lu, J. Barthel, H. L. Meyerheim, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* 71 , 2005 , 144416
4. R. O. Jones, o. Gunnarson, *Rev. Mod. Phys.* 61, 1989 , 689
5. S. Baroni, A. Dalcorso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi, <http://www.pwscf.org>
6. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, *Phys. Rev. B* 13 , 1976 , 5188
7. A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* 7 , 1973 , 8412
8. D.J. Chadi, *Phys. Rev. B* 16 , 1977 , 1746
9. N. Marzari, D. Vanderbilt, M. c. Payne, *Phys. Rev. Lett.* 79 , 1997 , 1337
10. S. J. Hashemifar, P. Kratzer, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* 94 , 2005 , 096402
11. Z. Yang, K. Zhang, S. Ke, and X. Xie, *Phys. Rev. B* 56 , 1997 , 6727
12. E. Sasioglu, L. Sadratskii, and P. Bruno (*unpublished*) cited in reference [3]
13. S. Picozzi, A. Continenza, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* 66 , 2002 , 094421
14. M. Peressi, N. Binggli, A. Baldereschi, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 31 , 1998 , 1273
15. A. Debernardi, M. Peressi, A. Baldereschi, *Computational Materials science* , 33 , 2005 , 263

میانی در دو سمت پیوندگاه قابل استخراج است . شکل (۴) نمودار نواری در پیوندگاه را نشان می دهد.



شکل (۴): ناپیوستگی نواری در پیوندگاه

نتیجه گیری

در بررسی پیوندگاه $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MnMn}/\text{GaAs}(001)$ تعداد کمی حالت های سطح مشترک در گاف کانال اسپینی اقلیت مشاهده شد . اثرات سطح مشترک روی قطبش اسپینی در سطح فرمی بسیار حائز اهمیت است از جمله موجب از بین رفتن ماهیت نیم فلزی Co_2MnSi در محل اتصال با نیم رسانا می شود. با این وجود قطبش اسپینی بالایی در سطح فرمی، حدود ۹۰٪، به دست آمد که در مقایسه با مقدار تجربی افزایش قابل توجهی داشته است.